

Seminar zur Vorlesung

Anorganische Chemie III

Wintersemester 2017/18

Christoph Wölper

Institut für Anorganische Chemie der Universität Duisburg-Essen

Wiederholung

Was bisher geschah

mathematische Gruppen

- Kristallklassen/Punktgruppen
- Raumgruppen (spezielle Lagen ...)

dichte und dichteste Kugelpackungen

- 6 bis 12 nächste Nachbarn
 - ⇒ Kuboktaeder (12)
 - ⇒ Antikuboktaeder (12)
 - ⇒ Würfel (8)
 - ⇒ Oktaeder (6)
- Symmetrie der Grundkörper gibt Gittertyp vor
 - ⇒ Kuboktaeder \mapsto kubisch F
 - ⇒ Antikuboktaeder \mapsto hexagonal
 - ⇒ Würfel \mapsto kubisch I
 - ⇒ Oktaeder \mapsto kubisch P

Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$

2 unabhängige spezielle Lagen mit oktaedrischer Punktsymmetrie

→ bei 0 0 0 (Wyckoff 4a)

⇒ symmetrieäquivalente Lagen bei $0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$, $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$ und $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$

⇒ also alle Ecken und Flächenmitten der Elementarzelle bzw. alle Gitterpunkte

→ bei $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ (Wyckoff 4b)

⇒ symmetrieäquivalente Lagen bei $0 0 \frac{1}{2}$, $0 \frac{1}{2} 0$ und $\frac{1}{2} 0 0$

⇒ also die Raummitte und alle Kantenmitten

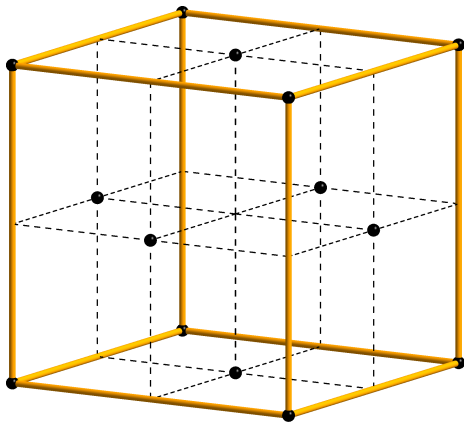
eine spezielle Lagen mit tetraedrischer Punktsymmetrie

→ bei $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ (Wyckoff 8c)

⇒ symmetrieäquivalente Lagen bei $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$, $\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$,
 $\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$, $\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$, $\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}$, $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}$ und $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$

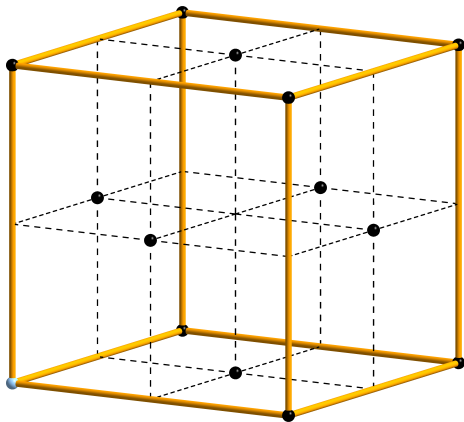
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



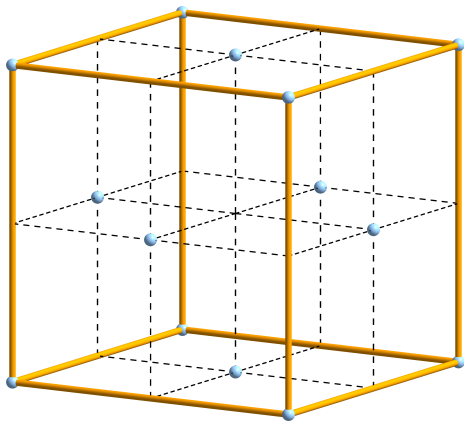
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



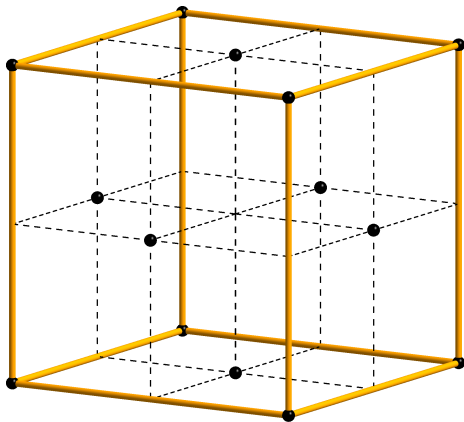
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



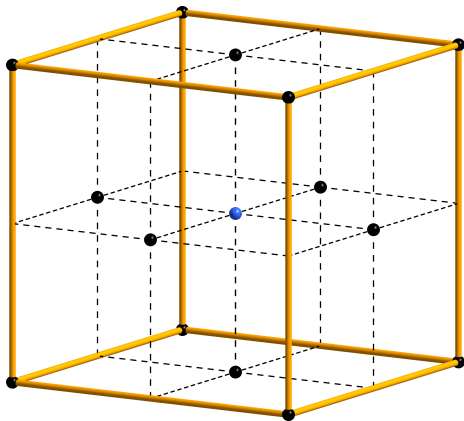
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



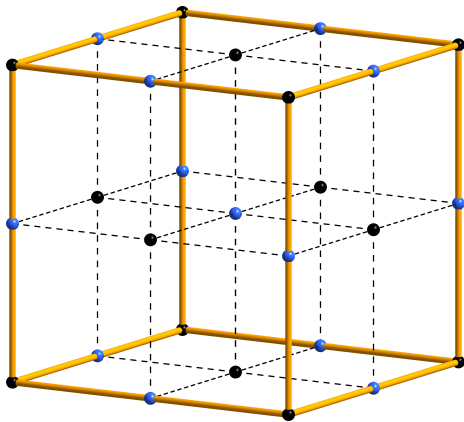
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



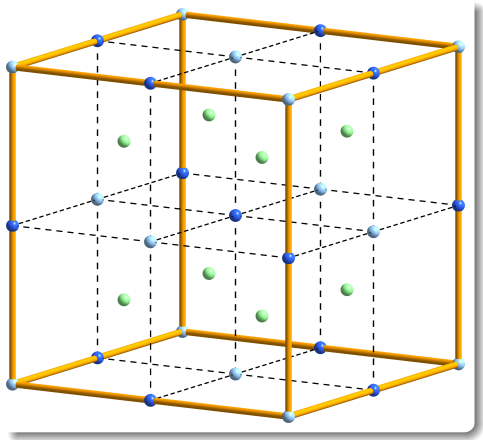
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



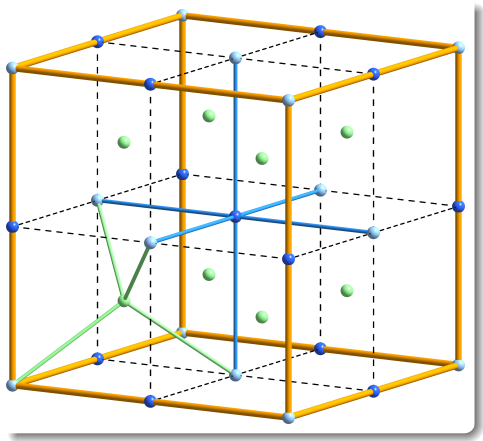
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



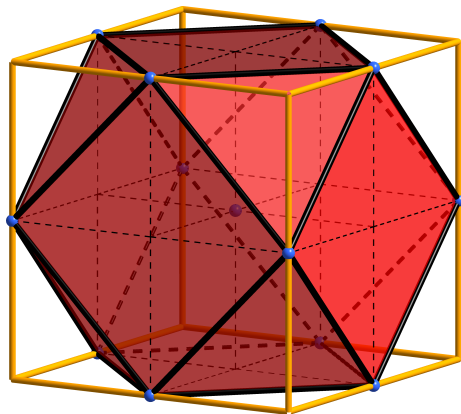
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



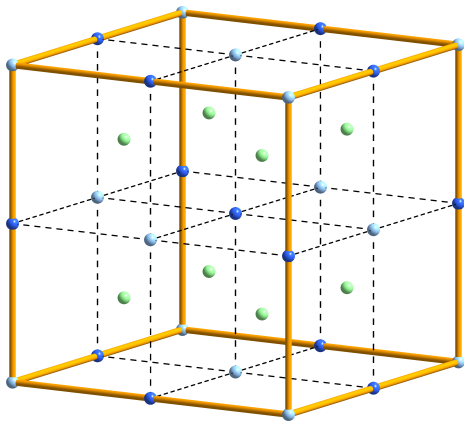
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



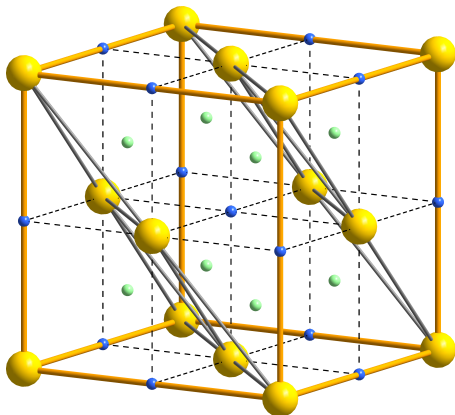
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



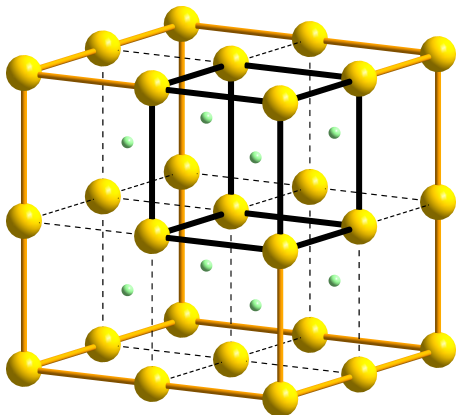
ein Atom auf 4a

Struktur vieler Metalle

- Münzmetalle
- Nickel-Gruppe
- Rhodium, Iridium
- Calcium, Strontium
- Blei
- Aluminium

Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



Besetzung beider Lagen mit Oktaedersymmetrie mit gleichen Atomen ändert die Symmetrie

→ „Tetraederlücke“ hat jetzt oktaedrische Symmetrie!

neue Elementarzelle

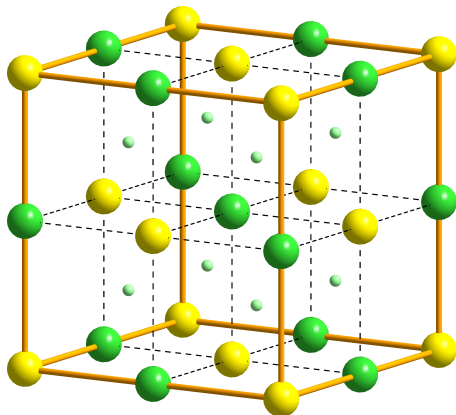
→ $1/8$ der alten Zelle

→ nicht mehr flächen-zentriert

neue Raumgruppe $Pm\bar{3}m$

Strukturtypen

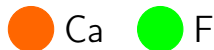
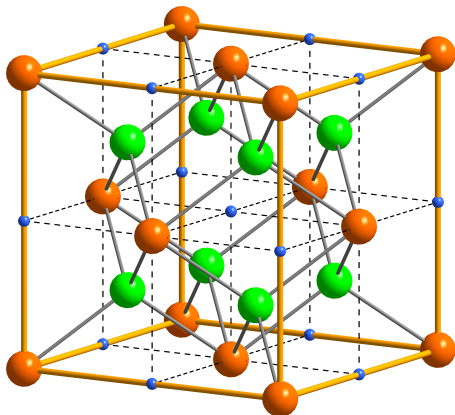
Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



bei Besetzung von 4a
und 4b mit verschiedenen
Atomen ergibt sich die
NaCl-Struktur

Strukturtypen

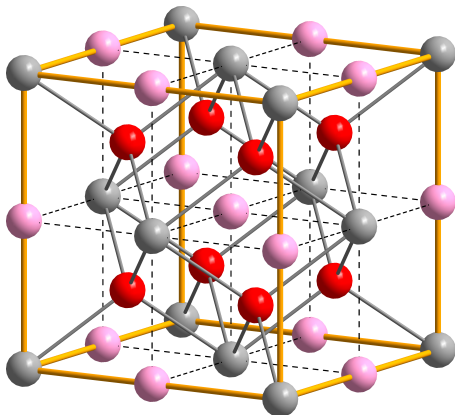
Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



- # zweite Atomsorte besetzt
Lagen mit tetraedrischer
Symmetrie (8c)
→ CaF_2 -Struktur
- # 4 Lagen mit
Oktaedersymmetrie
- # 8 Lagen mit
Tetraedersymmetrie
- # AB_2 -Struktur

Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



zweite Atomsorte besetzt
Lagen mit tetraedrischer
Symmetrie und die mit
oktaedrischer

→ BiLi₃-Struktur

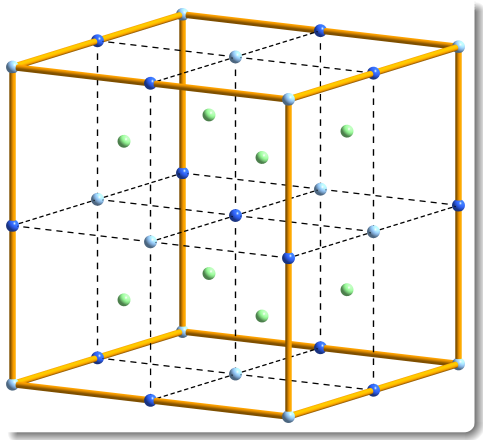
Verhältnis von 4:12

→ AB₃-Struktur

zwei unabhängige
Li-Atome

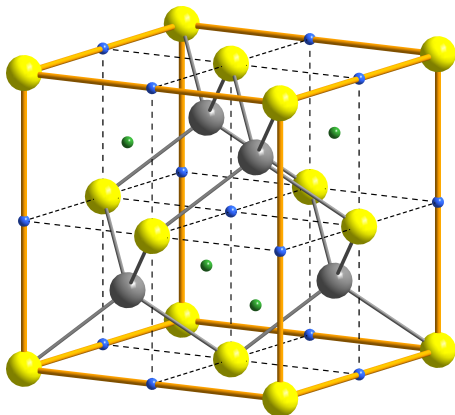
Strukturtypen

Kubisch flächenzentriert $Fm\bar{3}m$



Strukturtypen

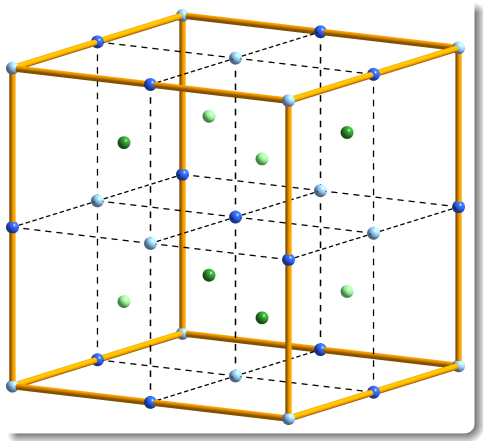
Zinkblende und Diamant



- # nur die Hälfte der Tetraederlücken besetzt
 - Problem: alle äquivalent
 - es sollten alle oder gar keine besetzt sein
- # Änderung der Symmetrie
 - je 4 der Tetraederlücken äquivalent
 - neue Raumgruppe $F\bar{4}3m$
 - Spiegelebenen senkrecht zu den Achsen fehlen

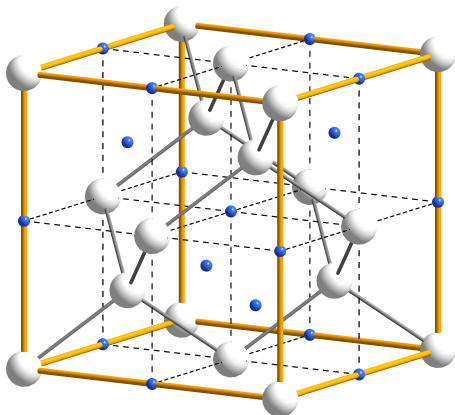
Strukturtypen

Zinkblende und Diamant



Strukturtypen

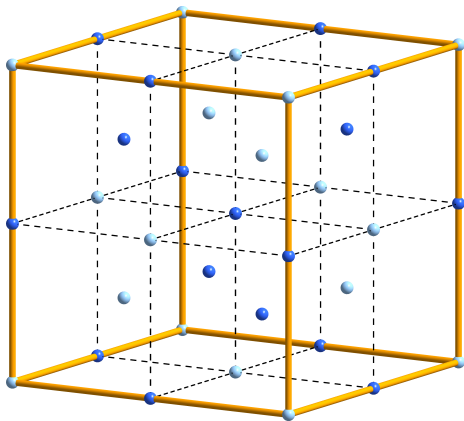
Zinkblende und Diamant



- # „Zn“ und „S“ Position
sind jetzt äquivalent
- Änderung der
Symmetrie
 - zusätzliche
d-Gleitspiegelebene
 - neue Raumgruppe
 $Fd\bar{3}m$

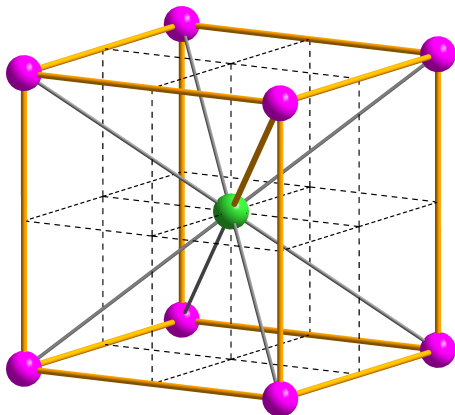
Strukturtypen

Zinkblende und Diamant



Strukturtypen

Kubisch primitiv $Pm\bar{3}m$



keine dichteste Packung

primitiv(!)

Strukturtypen

Kubisch primitiv $Pm\bar{3}m$

